



TITLE:

14.クラスターモデル計算による
La₂CuO₄の電子状態(東京理科大学大学院理学研究科物理学専攻,修士論文題目・アブストラクト
(1989年度))

AUTHOR(S):

時松, 修

CITATION:

時松, 修. 14.クラスターモデル計算によるLa₂CuO₄の電子状態(東京理科大学大学院理学研究科物理学専攻,修士論文題目・アブストラクト(1989年度)). 物性研究 1990, 54(6): 740-740

ISSUE DATE:

1990-09-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/94184>

RIGHT:

14. クラスターモデル計算による La_2CuO_4 の電子状態

時 松 修

酸化物高温超伝導体の母体となる La_2CuO_4 結晶の電子状態を定性的に理解することは、超伝導のメカニズムを解明するのに重要である。この結晶の電子状態は光電子分光法(1)など種々の実験的手法で研究されている。また理論的にはバンド計算(2)がおこなわれているが、強い電子相関のため詳細な描像を知るには限界がある。そのためクラスターモデル(3)によって計算がおこなわれるようになった。

La_2CuO_4 結晶は 260°C より高温で正方晶、それより低温で斜方晶(4)である。斜方晶 La_2CuO_4 結晶について、最も簡単な CuO_4 クラスターをとり、モデル計算をおこなった。まず Cu^{2+} および O^{2-} の周りに十分な数の点電荷を配置してクーロンポテンシャルを決定し、結晶の対称性を反映するようにそれを球面調和関数で展開した。波動関数としては a_1 および b_1 対称性をもつものを Cu^{2+} の 3d 軌道と、 O^{2-} の 2p 軌道の線形結合とから選んだ。その結果得られる両者の波動関数の混成の割合は、いろいろな物理量にどのように影響されるかが定性的に理解できた。

(1) K.Okada and A.Kotani: J.Phys.Soc.Jpn. 58, 2578 (1989).

(2) L.F.Mattheiss: Phys.Rev.Lett. 58, 1028 (1987).

(3) M.Eto, R.Saito and H.Kamimura: Solid.State.Comm. 71, 425 (1989).

(4) J.M.Longo and P.M.Racah: J.Solid.State.Chem. 6, 526 (1973).